液体ヘリウムの構造因子と集団運動

西　山　敏　之（阪大教養）

（3月16日受理）

要　旨

液体ヘリウムIIによる中性子散乱の微分断面積から求められるdynamical form factor S(**k**, ω)が、励起準位の決定に役立つことはよく知られているところであるが、最近Puff[1]は直接S(**k**, ω) から励起振動数の平方を求める方法を提案している。この結果は集団記述法[2),3)]で得られた振動数の式と全く一致していることがわかる。しかしこれらの方法の適用範囲は長波長の領域に限られ、短波長の領域にそのまま拡張することはできない。その理由は集団記述の立場では、原子密度のフーリエ係数が、長波長側ではよい近似で正しい励起準位を与えるけれども、短波長側ではいわゆる無秩序近似（RPA）の適用が許されず、もはやよい集団座標とは認められない事情によるものである。§1ではPuff の結果と集団記述法の関係を明らかにしておく。§2ではRPAで無視された項を前論文の方法[4)]に従つて取扱い、より正確な集団座標の形をしらべる。§3ではS(**k**, ω) の総和則に関係して、かなり大きい運動量の領域について議論する。

§1　Dynamical Form Factor S(**k**, ω)

Puff によれば励起振動数 ω_k の平方は

$$\omega_{\mathbf{k}}^2=\frac{M}{2\pi k^2}\int_{-\infty}^{\infty}\omega^3 S(\mathbf{k},\omega)d\omega=\frac{k^4}{4M^2}+\langle T\rangle_{AV}+\frac{1}{M^2}\int d^3\mathbf{r}\,\rho S(\mathbf{r})[1-\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})]\left(\mathbf{k}\cdot\frac{\partial}{\partial\mathbf{r}}\right)^2 V(r) \tag{1.1}$$

によつて与えられている。ここにMは原子質量、$\langle T\rangle_{AV}$ は平均運動エネルギー、S(**r**)は粒子数密度 $\rho(\mathbf{r})$ として、$\{\langle\rho(\mathbf{r})\rho(0)\rangle_{AV}$

$-\rho^2\delta(\mathbf{r})\}/\rho^2$で与えられる動径分布関数、$\rho$は平均粒子数密度、$V(r)$は２体相互作用ポテンシャルである。$S(\mathbf{k},\omega)$は$\rho(\mathbf{r})$のフーリエ係数$\rho_{\mathbf{k}}$の時間交換子を用い、全粒子数$N$として

$$S(\mathbf{k},\omega)=\frac{1}{N}\int<[\rho_{\mathbf{k}}(t),\rho_{-\mathbf{k}}(0)]>_{AV}e^{i\omega t}dt \tag{1.2}$$

で与えられる。$\langle A\rangle_{AV}$は一般に温度β^{-1}の熱平衡状態についての平均値であり、$\rho_{\mathbf{k}}$はN粒子系では粒子座標を$\mathbf{x}_j$として

$$\rho_{\mathbf{k}}=\sum_{j=1}^{N}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}_j} \tag{1.3}$$

で定められる。時間変化は全ハミルトニアンHに関するものである。

一方集団記述によれば振動数$\omega_{\mathbf{k}}$は

$$\omega_{\mathbf{k}}^2=-<[[H,\pi_{\mathbf{k}}],\pi_{-\mathbf{k}}]>_{AV},\quad(\hbar=1) \tag{1.4}$$

によつて求められる。ここに$\pi_{\mathbf{k}}$は集団座標$\xi_{\mathbf{k}}$の時間微係数であつて$i[H,\xi_{-\mathbf{k}}]$に等しい。$\langle A\rangle_{AV}=\mathrm{Tr}\,A\exp(-\beta H)/\mathrm{Tr}\exp(-\beta H)$とおいて(1.4)を書き直せば、$H$の固有状態をm, nで表わして

$$\omega_{\mathbf{k}}^2=-2\sum_{m,n}(E_m-E_n)(\pi_{\mathbf{k}})_{mn}(\pi_{-\mathbf{k}})_{nm}\,e^{-\beta E_m}\Big/\sum_m e^{-\beta E_m}, \tag{1.4'}$$

となることがわかる。ここで平均値が空間反転に対して変らないことを用いた。さらに$(\pi_{\mathbf{k}})_{mn}$は$(\xi_{\mathbf{k}})_{mn}$を用いて$i(E_m-E_n)(\xi_{-\mathbf{k}})_{mn}$と書くことができるから(1.4')は

$$\omega_{\mathbf{k}}^2=-2\sum_{m,n}(E_m-E_n)^3(\xi_{-\mathbf{k}})_{mn}(\xi_{\mathbf{k}})_{nm}e^{-\beta E_m}\Big/\sum_m e^{-\beta E_m}$$

または、$E_m-E_n=\omega_{mn}$とおいて

$$\omega_{\mathbf{k}}^2=\sum_{m,n}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\{\omega^3\delta(\omega+\omega_{mn})\cancel{((\xi_{\mathbf{k}})_{mn}(\xi_{-\mathbf{k}})_{nm}}-\omega^3\delta(\omega-\omega_{mn})(\xi_{-\mathbf{k}})_{mn}(\xi_{\mathbf{k}})_{nm}\}\times$$
$$\times e^{-\beta E_m}\Big/\sum_m e^{-\beta E_m}$$

$$=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}dt\int_{-\infty}^{\infty}\omega^3 d\omega\sum_{m,n}\{(\xi_{\mathbf{k}})_{mn}(\xi_{-\mathbf{k}})_{nm}e^{i(\omega+\omega_{mn})t}-(\xi_{-\mathbf{k}})_{mn}(\xi_{\mathbf{k}})_{nm}e^{i(\omega-\omega_{mn})t}\}\times$$

$$\times e^{-\beta E_m}/\sum_m e^{-\beta E_m}$$

$$=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\omega^3 d\omega\int_{-\infty}^{\infty}<[\xi_{\mathbf{k}}(t),\xi_{-\mathbf{k}}(0)]>_{AV}e^{i\omega t}dt \qquad (1\cdot5)$$

の形に書き更められる。ここで集団座標として

$$\xi_{\mathbf{k}}=k^{-1}(M/N)^{\frac{1}{2}}\rho_{\mathbf{k}} \qquad (1\cdot6)$$

を採用すれば、(15)は(1・1)と完全に一致していることがわかる。(1・6)はRPAが成り立つ範囲では正しい集団座標と考えられているものである。

§2 非線型項を含む集団座標

Feynmanは $\rho_{\mathbf{k}}$（または(1・6)）を基準状態 $|0>$ に掛けたものを運動量kの励起状態の波動関数と考えて、構造因子とエネルギー固有値の関係を求めた。その後Kuper,[4] Cohen[5]らは k の大きい領域ではこの波動関数に、$\rho_{\mathbf{k}}$ について2次の項を加えたものを採用すべきであると考え、運動量kの波動関数として

$$|\mathbf{k}>=(\rho_{\mathbf{k}}+\sum_{l}A_{\mathbf{k},l}\,\rho_{\mathbf{k}-l}\,\rho_{l})|0>, \qquad (2\cdot1)$$

の形を採用した。Cohenは変分法により、Kuperは H の行列要素 $<0|\rho_{\mathbf{k}-l}^{+}\rho_{l}^{+}H\rho_{\mathbf{k}}|0>$ を摂動計算にとり入れて、係数 $A_{\mathbf{k}l}$ を求めた。前論文では集団記述に現れる非線型項を摂動としてエネルギーのずれを求めたが、そこでは無摂動系として相互作用のないフォノンと個別粒子の集団を考えた。非線型相互作用があると、たとえば運動量 $\mathbf{k}$ の無摂動状態 $|\mathbf{k}>_0$ は変換関数 U によって $U|\mathbf{k}>_0$ となり、物理量 A は UAU^{-1} に変形される。フォノンの演算子を $B_{\mathbf{k}}$, $B_{\mathbf{k}}^{+}$, 個別粒子の演算子を $A_{\mathbf{k}}$, $A_{\mathbf{k}}^{+}$ として摂動エネルギーを書くと、デバイ波数を q_D, オ1音速を C とおいて

$$H'=\sum_{\substack{p>q_D\\|\mathbf{p}-\mathbf{q}|>q_D\\q<q_D}}\Gamma_{\mathbf{p},\mathbf{q}}A_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}^{+}A_{\mathbf{p}}B_{\mathbf{q}}^{+}+h.c. \Bigg\} \qquad (2\cdot2)$$

$$\Gamma_{\mathbf{p},\mathbf{q}}=\frac{1}{2M(2MNCq)^{1/2}}\{2MC\mathbf{p}\cdot\mathbf{q}-q^2(MC+\frac{1}{2}q)\}$$

となる。変換関数は、相互作用表示で1次の項までとると

$$U=1-i\int_{-\infty}^{0}H'(t)\,dt=1-\sum_{\mathbf{p},\mathbf{q}}{}'\Gamma_{\mathbf{p},\mathbf{q}}\left(\frac{A^+_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}A_{\mathbf{p}}B^+_{\mathbf{q}}}{\omega_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}-\omega_{\mathbf{p}}+\omega_{\mathbf{q}}-i\delta}+\frac{A^+_{\mathbf{p}}A_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}B_{\mathbf{q}}}{\omega_{\mathbf{p}}-\omega_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}-\omega_{\mathbf{q}}-i\delta}\right)\tag{2.3}$$

によつて与えられる。δは正の微小量で、Σ' は (2.2)と同じ条件付きの総和を表わす。大きい運動量pに対して無摂動状態は$A^+_{\mathbf{p}}|0>_0$ で表わされるが、これに対応する集団変数としては

$$\zeta^{(0)}_{\mathbf{p}}=p^{-1}M^{\frac{1}{2}}(A^+_{-\mathbf{p}}+A_{\mathbf{p}})\tag{2.4}$$

で与えられるものを採用する。これは (1.6)を大きい運動量の領域にまで拡張適用したことに相当する。これを無摂動基準状態に演算すれば運動量pの励起状態（無摂動）が得られる。pの大きい所では非線型項の影響が無視できないことを考え、(2.3)によつて (2.4)を変形することにより、もつと正確な励起状態を与えるような集団変数を求めよう。それを$\zeta_{\mathbf{p}}$と書いて

$$\begin{aligned}\zeta_{\mathbf{p}}=U\zeta^{(0)}_{\mathbf{p}}U^{-1}=p^{-1}M^{\frac{1}{2}}\{A^+_{-\mathbf{p}}+A_{\mathbf{p}}&+\sum_{\mathbf{q}}{}'\Gamma_{\mathbf{p},\mathbf{q}}\left(\frac{A^+_{-\mathbf{p}+\mathbf{q}}B^+_{-\mathbf{q}}}{\omega_{\mathbf{p}}-\omega_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}-\omega_{\mathbf{q}}+i\delta}+\frac{A_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}B_{\mathbf{q}}}{\omega_{\mathbf{p}}-\omega_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}-\omega_{\mathbf{q}}-i\delta}\right)\\&+\sum_{\mathbf{q}}{}'\Gamma_{\mathbf{p}-\mathbf{q},-\mathbf{q}}\left(\frac{A^+_{-\mathbf{p}+\mathbf{q}}B_{\mathbf{q}}}{\omega_{\mathbf{p}}-\omega_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}+\omega_{\mathbf{q}}+i\delta}+\frac{A_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}B^+_{-\mathbf{q}}}{\omega_{\mathbf{p}}-\omega_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}+\omega_{\mathbf{q}}-i\delta}\right)\}\end{aligned}\tag{2.5}$$

を得る。ここで$\Gamma_{\mathbf{p},\mathbf{q}}\equiv\Gamma_{-\mathbf{p},-\mathbf{q}}$を用いた。エネルギーの極小値が現れる$p=2q_D$の近傍では (2.5)の分母は零にならないから$\delta=0$とおいてもよい。この集団座標が、集団表示に移る以前の古い表示ではどんな形をしているかをみるために、$B^+_{\mathbf{q}}$, $B_{\mathbf{q}}$ の代りにフォノンの実座標Qと運動量（正準共役量）Pを用いる。それらは

$$Q_{\mathbf{q}} = i\left(\frac{N}{2M\omega_{\mathbf{q}}}\right)^{\frac{1}{2}}(B^{+}_{-\mathbf{q}}+B_{\mathbf{q}}),\quad P_{\mathbf{q}} = iq^{-1}\left(\frac{M\omega_{\mathbf{q}}}{2N}\right)^{\frac{1}{2}}(B^{+}_{\mathbf{q}}-B_{-\mathbf{q}}) \tag{2.6}$$

で定められる。簡単な代数計算をしてから、$Q_{\mathbf{q}}\to\rho_{\mathbf{q}}\ (q<q_D)$ $P_q\to\phi_q\ (q<q_D)$, $\sqrt{N}(A^{+}_{-\mathbf{p}}+A_{\mathbf{p}})\to\rho_{\mathbf{p}}\ (p>q_D)$ $(i/2\sqrt{N})(A^{+}_{\mathbf{p}}-A_{\mathbf{p}})\to\phi_{\mathbf{p}}\ (p>q_D)$ の置き換えによつて元の表示に移行する（前論文参照）。その結果得られた古い表示における集団座標を $\zeta_{\mathbf{p}\ \mathrm{old}}$ と書くと

$$\zeta_{\mathbf{p}\ \mathrm{old}} = p^{-1}(M/N)^{\frac{1}{2}}\rho_{\mathbf{p}} + \sum_{\mathbf{q}}{}'\Big[\left(\frac{\omega_{\mathbf{q}}}{2}\right)^{\frac{1}{2}}\frac{M}{pqN}\Big\{\frac{\Gamma_{p,q}}{\omega_{\mathbf{p}}-\omega_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}-\omega_{\mathbf{q}}}$$

$$+\frac{\Gamma_{\mathbf{p}-\mathbf{q},-\mathbf{q}}}{\omega_{\mathbf{p}}-\omega_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}+\omega_{\mathbf{q}}}\Big\}\rho_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}\rho_{\mathbf{q}} - \left(\frac{2}{\omega_{\mathbf{q}}}\right)^{\frac{1}{2}}\frac{Nq}{Mp}\Big\{\frac{\Gamma_{\mathbf{p},\mathbf{q}}}{\omega_{\mathbf{p}}-\omega_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}-\omega_{\mathbf{q}}}$$

$$-\frac{\Gamma_{\mathbf{p}-\mathbf{q},-\mathbf{q}}}{\omega_{\mathbf{p}}-\omega_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}-\omega_{\mathbf{q}}}\Big\}\phi_{-\mathbf{p}+\mathbf{q}}\phi_{-\mathbf{q}}\Big] \tag{2.7}$$

となる。これは粒子密度 ρ の正準共役量 ϕ が含まれている点を除いて、Cohen -Feynman の励起準位を与える演算子 (2.1)と同じ形をしている。極限として、オ１音速 C が非常に大きく、したがつて $\omega_{\mathbf{q}}$ ($Cq\gg pq/M$) であり、p も q_D よりずつと大きいと考えられる場合には、

$$\left.\begin{aligned}&\Gamma_{\mathbf{p},\mathbf{q}} = C(\mathbf{p}\cdot\mathbf{q})/(2NMCq)^{\frac{1}{2}},\\ &\omega_{\mathbf{q}} \gg \omega_{\mathbf{p}}-\omega_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}\end{aligned}\right\} \tag{2.8}$$

とおくことができる。ϕ を含む項の係数は零であつて

$$p(N/M)^{\frac{1}{2}}\zeta_{\mathbf{p}\ \mathrm{old}} = \rho_{\mathbf{p}} + \frac{1}{N}\sum_{q}{}'\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{q}}{q^2}\rho_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}\rho_{\mathbf{q}} \tag{2.9}$$

となり、$\mathbf{q}$ の総和に制限がつく以外は全く Cohen 等の結果と一致している。以上の結果を導くと、個別粒子の無摂動エネルギーとして $\omega_{\mathbf{p}}=p^2/2M$ とおいたが M を有効質量 M^* におきかえてもこの結果は変らない。つぎに述べるように無摂動系としては M^* を含むものを採用しなければならない。

§3 構造因子 S(**k**)

S(**k**, ω) についてはよく知られた総和則

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\omega\, S(\mathbf{k},\omega)=\frac{k^2}{M} \qquad (3\cdot1)$$

が成りたち、定義から

$$S(\mathbf{k},\omega)=-S(\mathbf{k},-\omega)=S(|\mathbf{k}|,\omega) \qquad (3\cdot2)$$

の関係がある。構造因子 S(**k**) は

$$S(\mathbf{k})=\langle\rho_{\mathbf{k}}\rho_{-\mathbf{k}}\rangle_{AV}/N \qquad (3\cdot3)$$

で与えられるから S(**k**, ω) を用いて

$$S(\mathbf{k})=\frac{1}{4\pi}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\, S(\mathbf{k},\omega)\coth\left(\frac{1}{2}\beta\omega\right) \qquad (3\cdot4)$$

と書くこともできる。励起エネルギーは k の小さい所では

$$\varepsilon(k)=\frac{k^2}{2MS(k)} \qquad (3\cdot5)$$

となるが、k の大きい所ではもはや成りたたない。これは S(**k**, ω) が ω の関数として $\omega=\varepsilon(\mathbf{k})$ で鋭いピークを持たず巾の広い構造を示すようになることと関係している。換言すれば H の固有状態がもはや (1・6) で表わすことができず、(2・1) またはもつと高次の項を含んだ正確な集団座標を用いなければならないことを意味する。このような集団座標に対しては、絶体零度 ($\beta\to\infty$) のとき (1・5) に含まれる時間交換子のフーリエ係数

$$C(\mathbf{k},\omega)=\int_{-\infty}^{\infty}\langle[\xi_{\mathbf{k}}(t),\ \xi_{-\mathbf{k}}(0)]\rangle_0\, e^{i\omega t}\,dt\ , \qquad (3\cdot6)$$

は S(**k**, ω) と異り唯一つの δ- 関数を含む項で表わされる。$\langle\quad\rangle_0$ は基準状態に関する平均値を表わす。つぎに非線型項による摂動状態について S(**k**, ω) の形を与えておこう。ここで考えている集団表示では、密度のフーリエ係数の

行列要素は、k の大きい領域では $\sqrt{N}(A^+_{-\mathbf{k}}+A_{\mathbf{k}})$ の行列要素によつて与えられる。それを絶対零度で求めるには、無摂動状態 n として $\langle n|U^{-1}(A^+_{-\mathbf{k}}+A_{\mathbf{k}})U|0\rangle$ を計算すればよい。これは (2.5)の行列要素と符号が異るだけであるから、状態 n として、フォノンと個別粒子各1個の2粒子状態を含むものをとり、$\omega>0$ に対して

$$S(\mathbf{p},\omega)=2\pi\sum_{n}\delta(\omega-\omega_n)(\chi_{\mathbf{p}})_{on}(\chi_{-\mathbf{p}})_{no}$$

$$=2\pi\delta(\omega-\omega_{\mathbf{p}})+2\pi\sum_{\mathbf{q}}{}'\delta(\omega-\omega_{\mathbf{p}-\mathbf{q}}-\omega_{\mathbf{q}})\left(\frac{\Gamma_{\mathbf{p},\mathbf{q}}}{\omega_{\mathbf{p}}-\omega}\right)^2 \tag{3.7}$$

の形となる。ω_n は無摂動系の励起エネルギーである。$\omega_{\mathbf{p}}$ が自由粒子のエネルギー $p^2/2M$ に一致すれば、(3.7)の才1項だけで総和則 (3.1)がつくされてしまうが、有効質量 M^* が M より大きいときは、才2項以下の寄与が重要になる。個別粒子の無摂動系として非圧縮性流体を考えれば $M^*=1.5M$ となる。これについてはさらに詳しい吟味を要するが、ここではこの値を仮定して総和則の積分を実行してみよう。やはり (2.8)の極限の場合を考えると総和則は

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\omega S(\mathbf{p},\omega)d\omega=\frac{p^2}{M^*}+\frac{p^2}{3M}=\frac{p^2}{M}$$

となつて才2項の補正が正しい値を与えている。ここで問題は個別粒子のハミルトニアンの処理法に帰着される。最近一柳氏が別の方法で $S(\mathbf{k},\omega)$ の形をしらべたがそれとの関係は他の機会にゆずる。

文　　献

1) R. D. Puff, Phys. Rev. 137 (1965) A406
2) T. Nishiyama, Prog. Theor. Phys. 17 (1957) 711; 物性研究 7 (1967) No.6
3) T. Usui, 低温現象 (物性物理学講座) p.250
4) C. G. Kuper, Proc. Roy. Soc. 233 (1955) 223
5) M. Cohen and R. P. Feynman, Phys. Rev. 107 (1957) 13
6) M. Ichiyanagi, 未発表。